

VASP程序使用简介

王艳磊 中国人民大学

2024年12月

VASP

(Vienna Ab-initio Simulation Package)

提纲

- VASP基本原理简介
- 基本知识
- 常用关键词使用说明
- 计算结果处理

VASP程序基本原理

VASP是基于赝势平面波基组的密度泛函程序，其前身是CASTEP 1989版本，其基本原理如下：

根据Bloch定理，对于周期体系，其电子波函数可以写为单胞部分和类波部分的乘积：

$$\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f_i(\vec{r})$$

其中，单胞部分的波函数可以用一组在倒易空间的平面波来表示：

$$f_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

这样，电子波函数可以写为平面波的加和：

$$\psi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{k}+\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}}$$

根据密度泛函理论，波函数通过求解**Kohn—Sham**方程来确定：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ion}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r})\right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

ε_i : Kohn—Sham本征值

V_{ion} : 电子与核之间的作用势

V_H 和 V_{XC} : 电子的Hartree势和交换—相关势

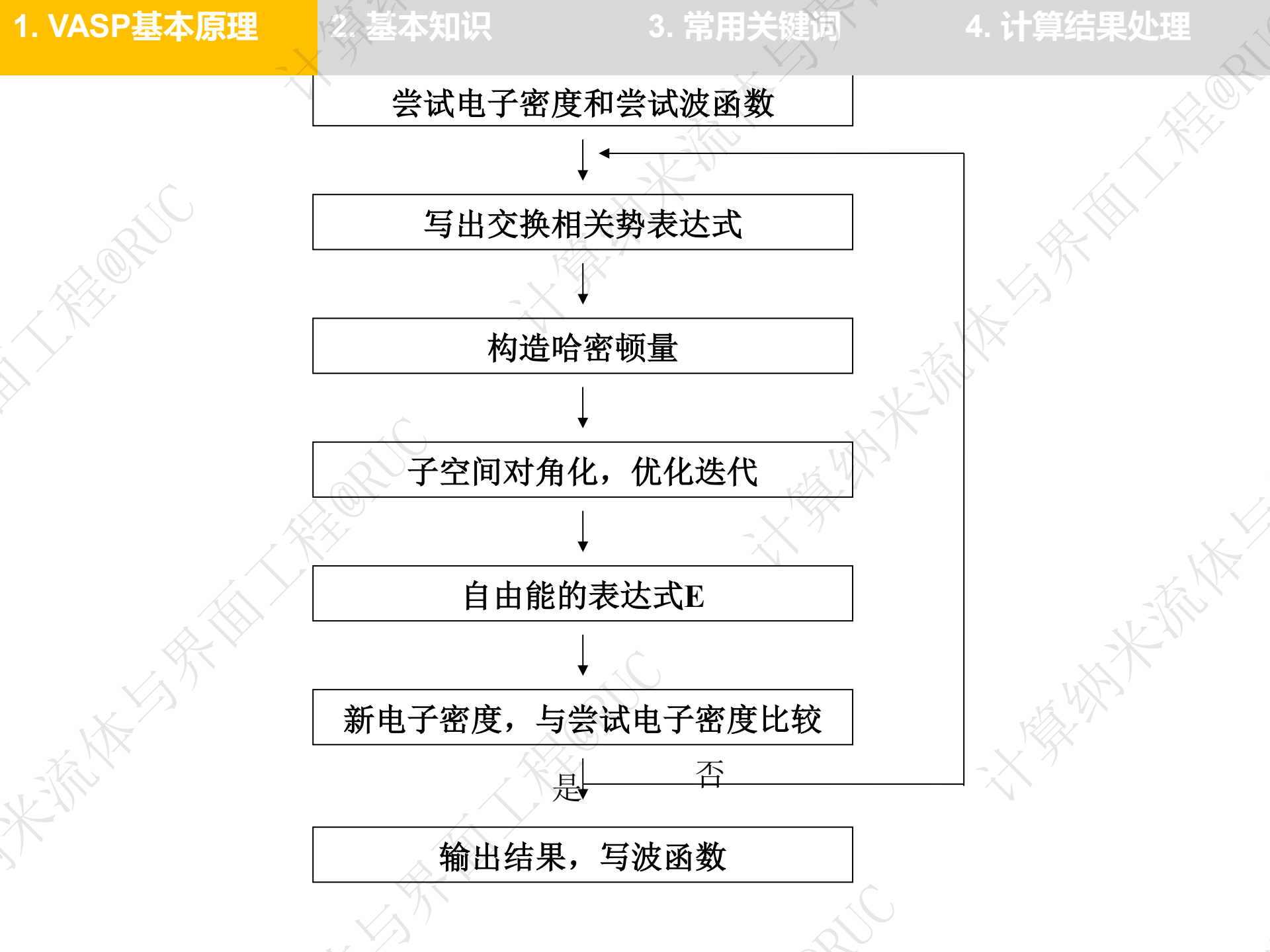
$$V_H(\vec{r}) = e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}'$$

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{XC}[n(\vec{r})]}{\delta n(\vec{r})}$$

基于平面波表示的Kohn—Sham方程：

$$\sum_{\vec{G}'} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \delta_{\vec{G}\vec{G}'} + V_{ion}(\vec{G} - \vec{G}') + V_H(\vec{G} - \vec{G}') + V_{XC}(\vec{G} - \vec{G}') \right] c_{i,\vec{k}+\vec{G}} = \varepsilon_i c_{i,\vec{k}+\vec{G}}$$

上式中动能项是**对角化**的，通过求解上式方括号中的**哈密顿矩阵**来求解KS方程，该矩阵的大小由**截至能 (cutoff energy)**来决定。



与原子轨道基组相比，平面波基组有如下优点：

- 1) 无需考虑BSSE校正；
- 2) 平面波基函数的具体形式不依赖于核的坐标，这样，一方面，价电子对离子的作用力可以直接用Hellman-Feymann定理得到解析的表达式，计算显得非常方便，另一方面也使能量的计算在不同的原子构象下具有基本相同的精度；
- 3) 很方便地采用快速傅立叶变换(FFT)技术，使能量、力等的计算在实空间和倒易空间快速转换，这样计算尽可能在方便的空间中进行；
- 4) 计算的收敛性和精确性比较容易控制，因为通过截断能的选择可以方便控制平面波基组的大小。

平面波基组方法的不足之处：

- 1) 所求得的波函数很难寻找出一个直观的物理或化学图象与化学家习惯的原子轨道的概念相联系，即其结果与化学家所感兴趣的成键和轨道作用图象很难联系出来，这就为我们计算结果的分析带来了困难；
- 2) 考察某些物理量时，例如原子电荷，涉及到积分范围的选取，这造成所得物理量的绝对值意义不大；
- 3) 有些方法，例如杂化密度泛函方法不易于采用平面波基组方法实现。

VASP程序基本知识

1. VASP程序主要功能：

1) 能量计算

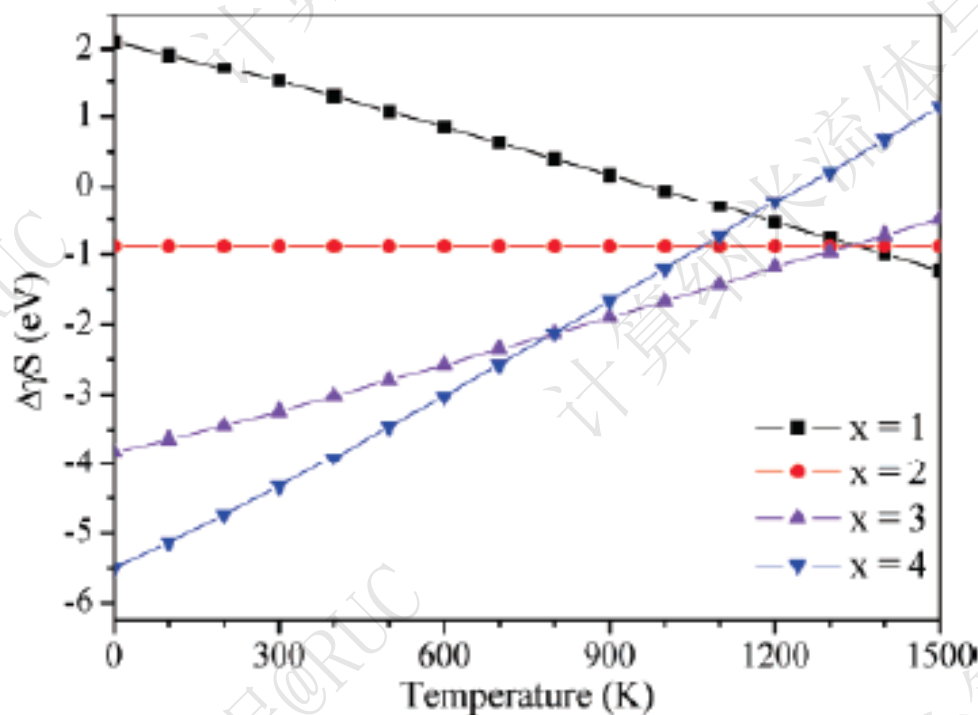
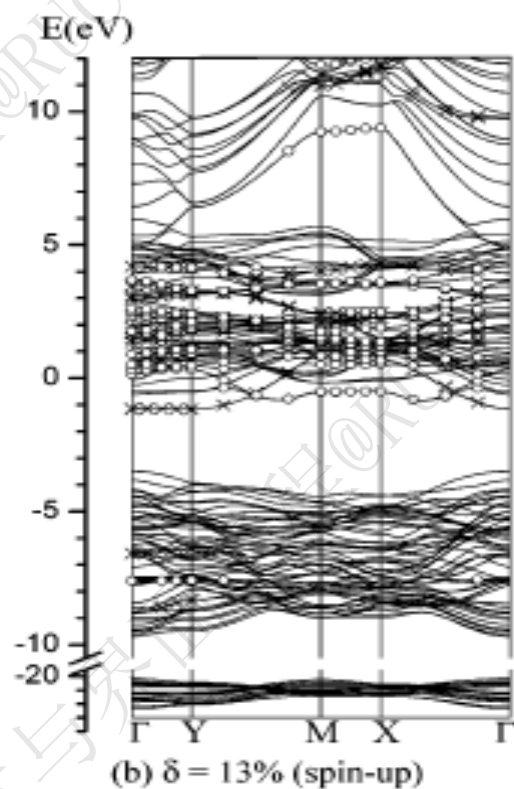
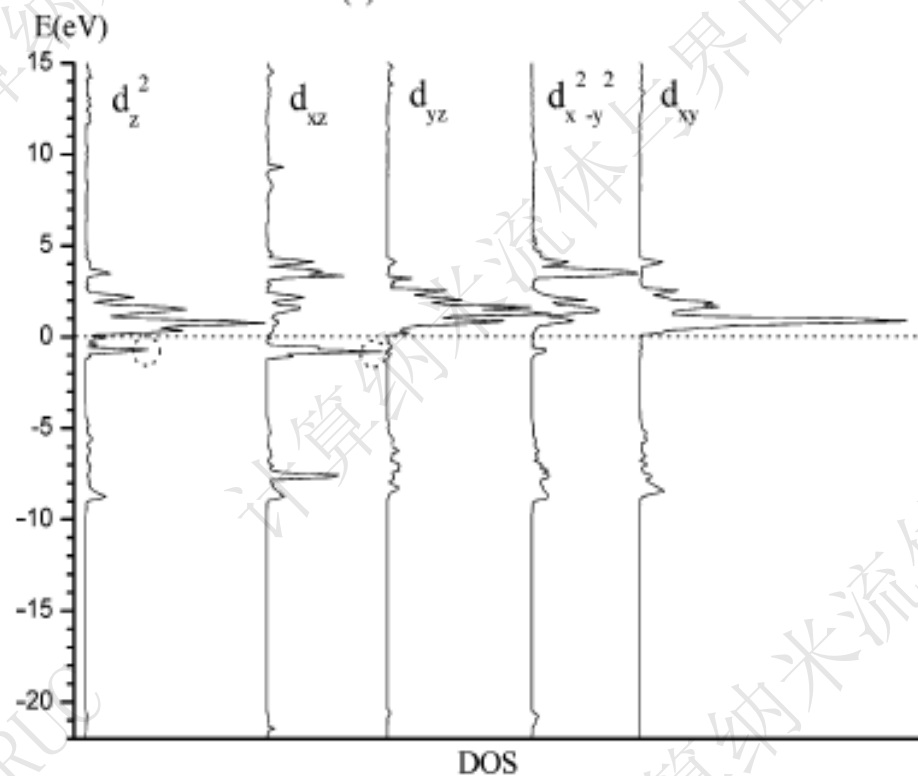


Figure 3. Free-energy change of the formation of the (1 × 1) Au/TiO_x/Mo(112) surface with different compositions as a function of temperature at the experimental oxygen pressure of 2×10^{-8} Torr.

2) 电子结构(能带结构、DOS、电荷密度分布)

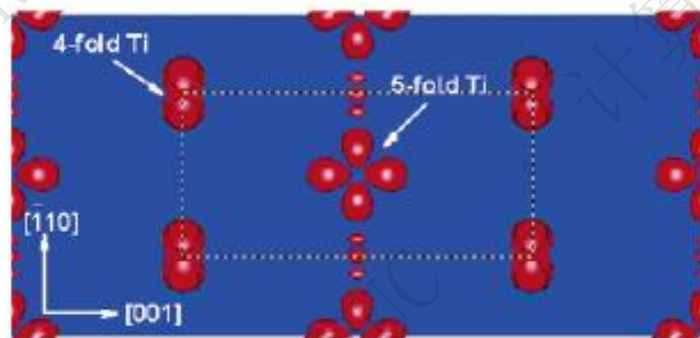


能带结构

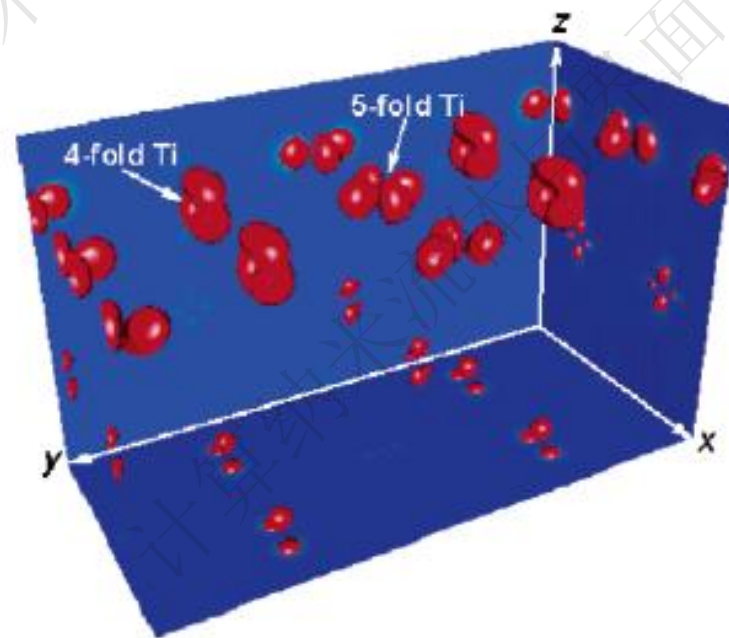


DOS

电荷密度分布



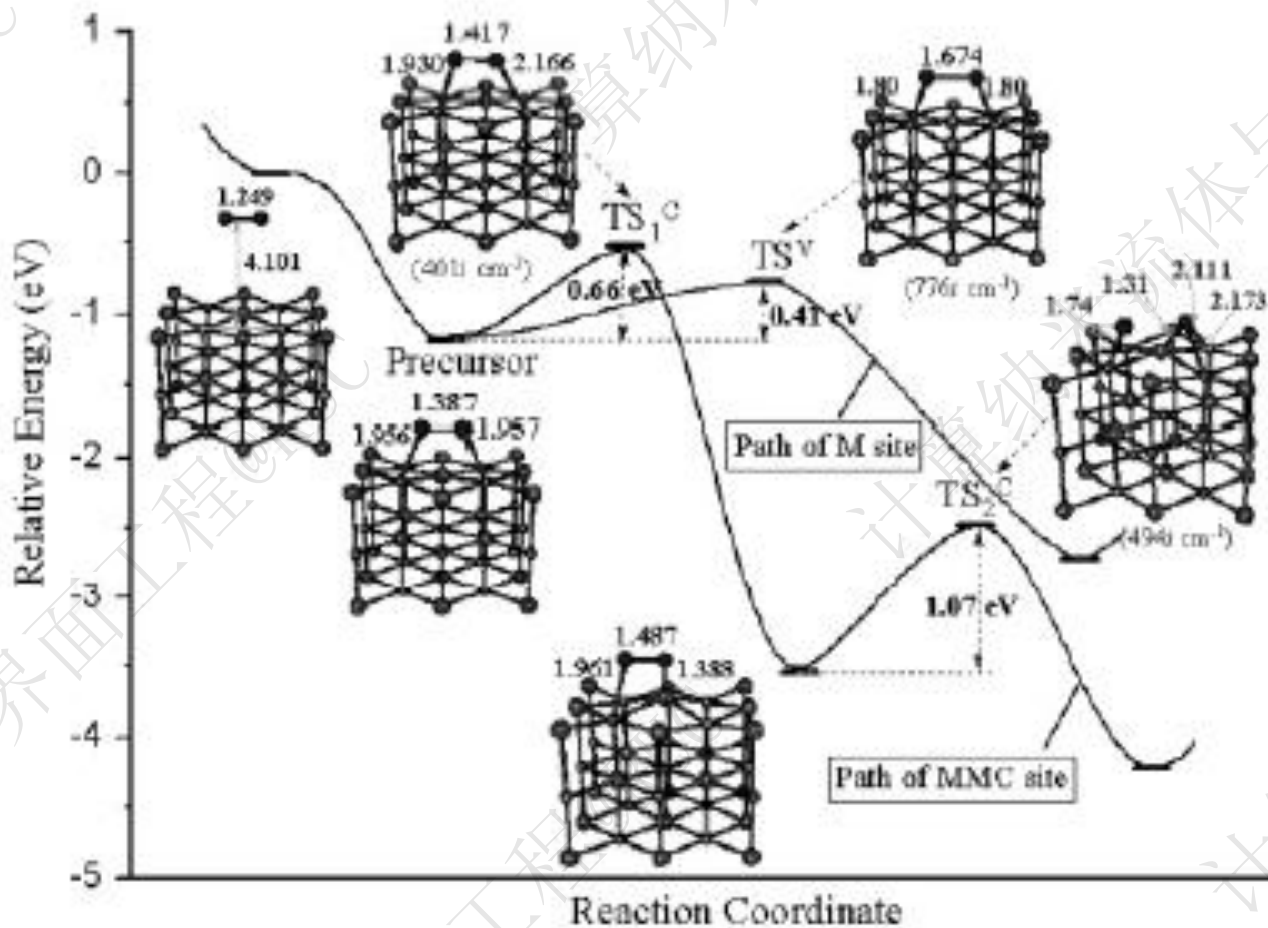
(a) Top view



(b) Side view

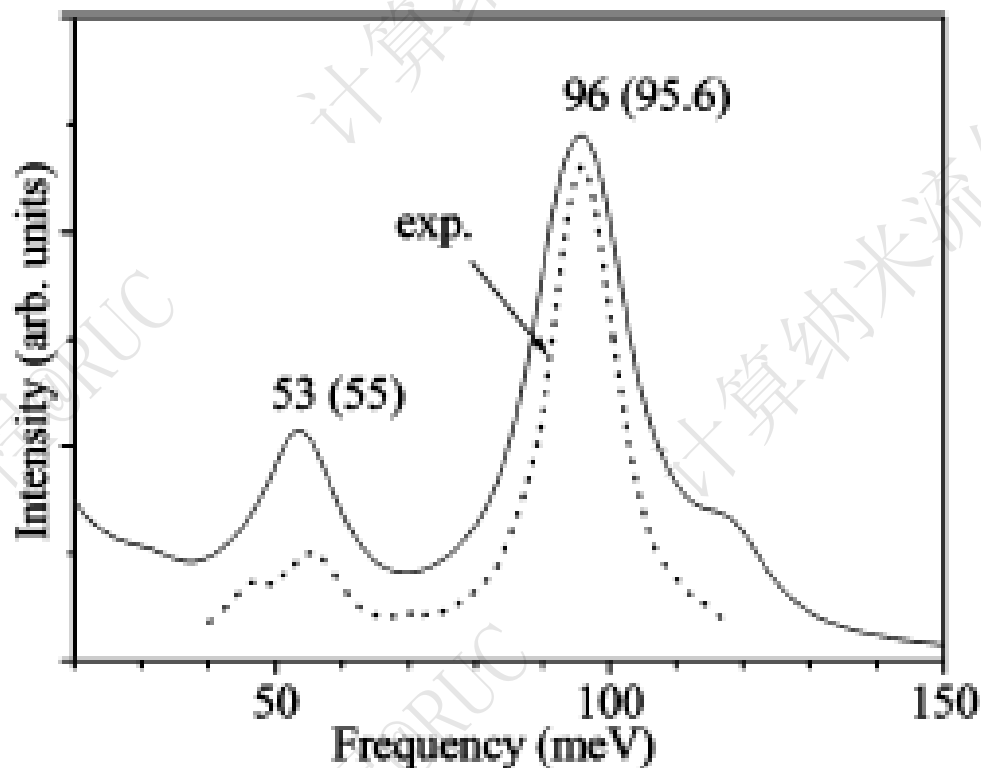
J. Phys. Chem. B, 2005, 109, 19270

3) 构型优化(含过渡态)和反应途径



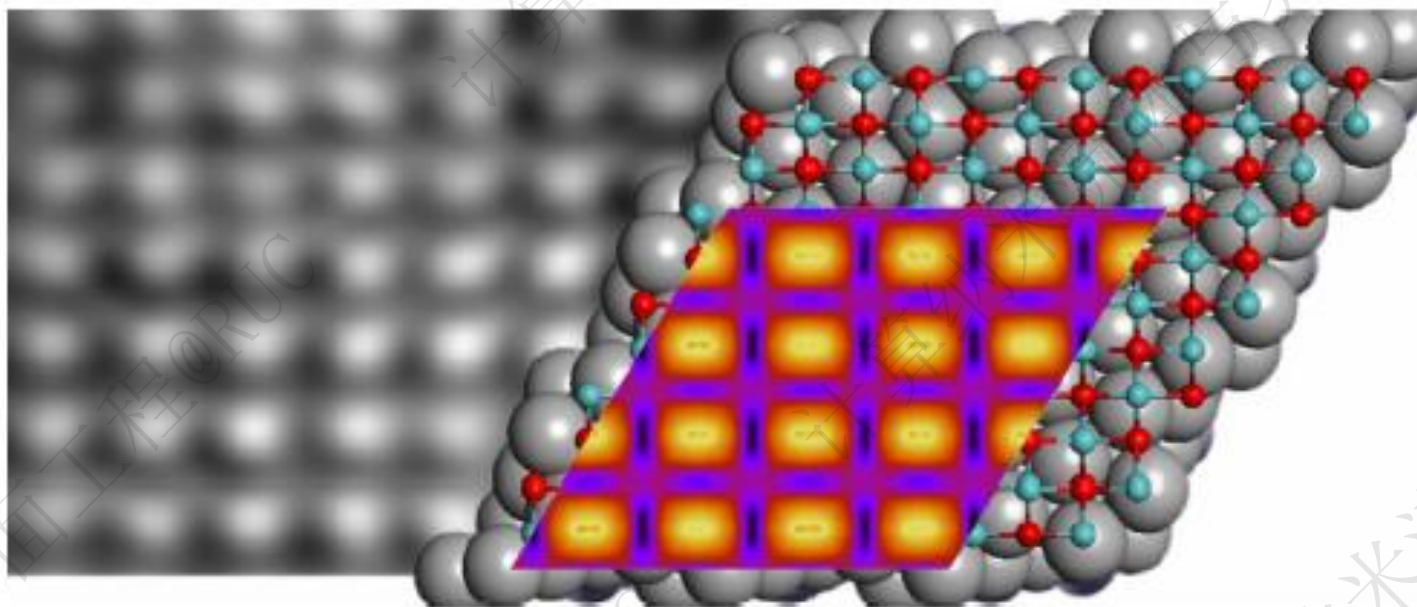
J. Phys. Chem. B, 2006, 110, 15454

4) 频率计算和HREELS能谱模拟



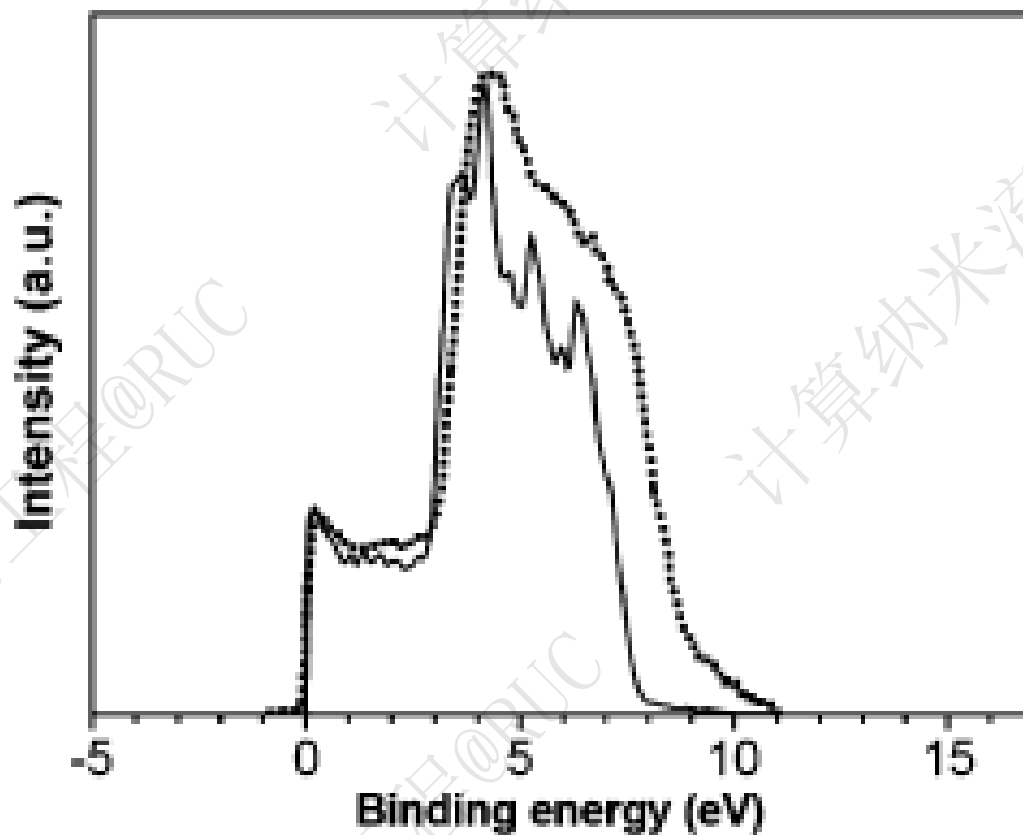
J. Phys. Chem. C, 2007, 111, 7437

5) STM图像模拟



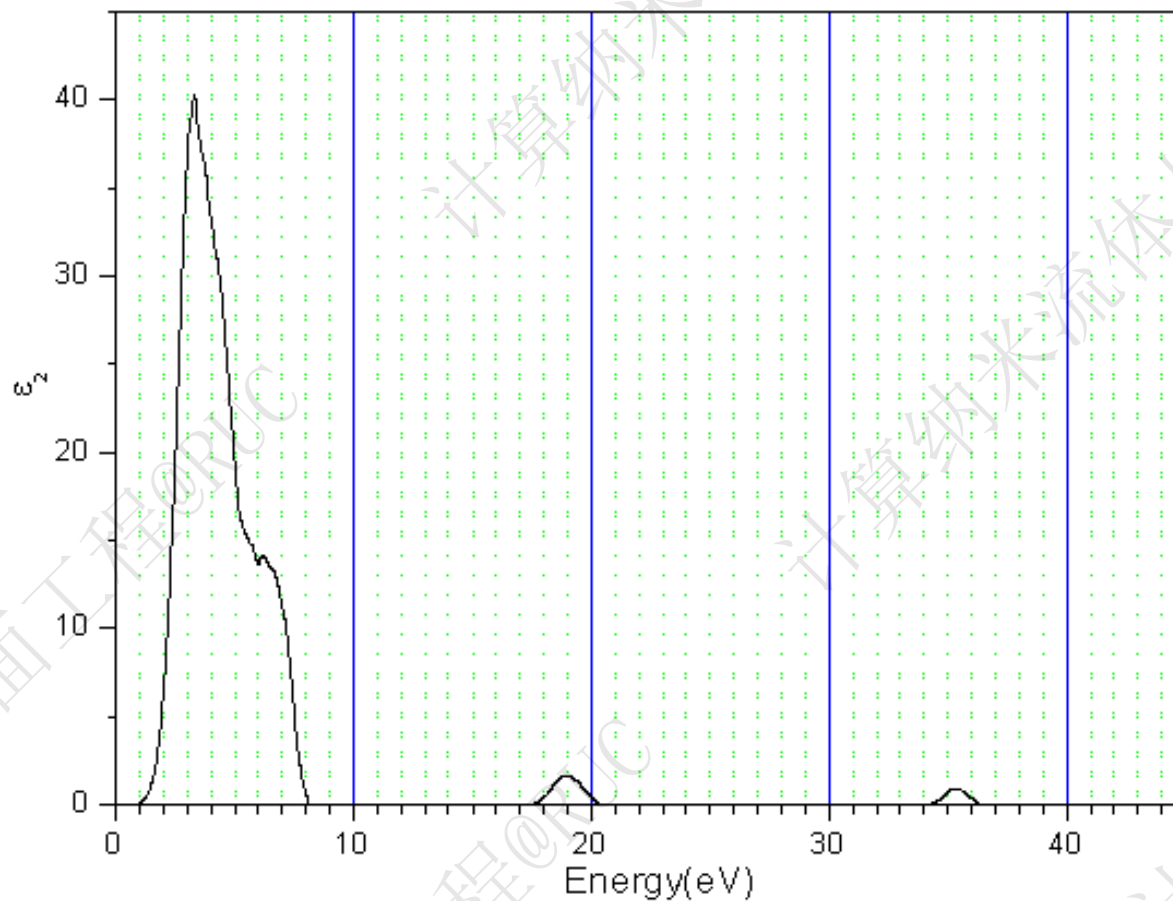
Surf. Sci., 2007, 601, 3488

6) UPS能谱图像模拟



Surf. Sci., 2007, 601, 3488

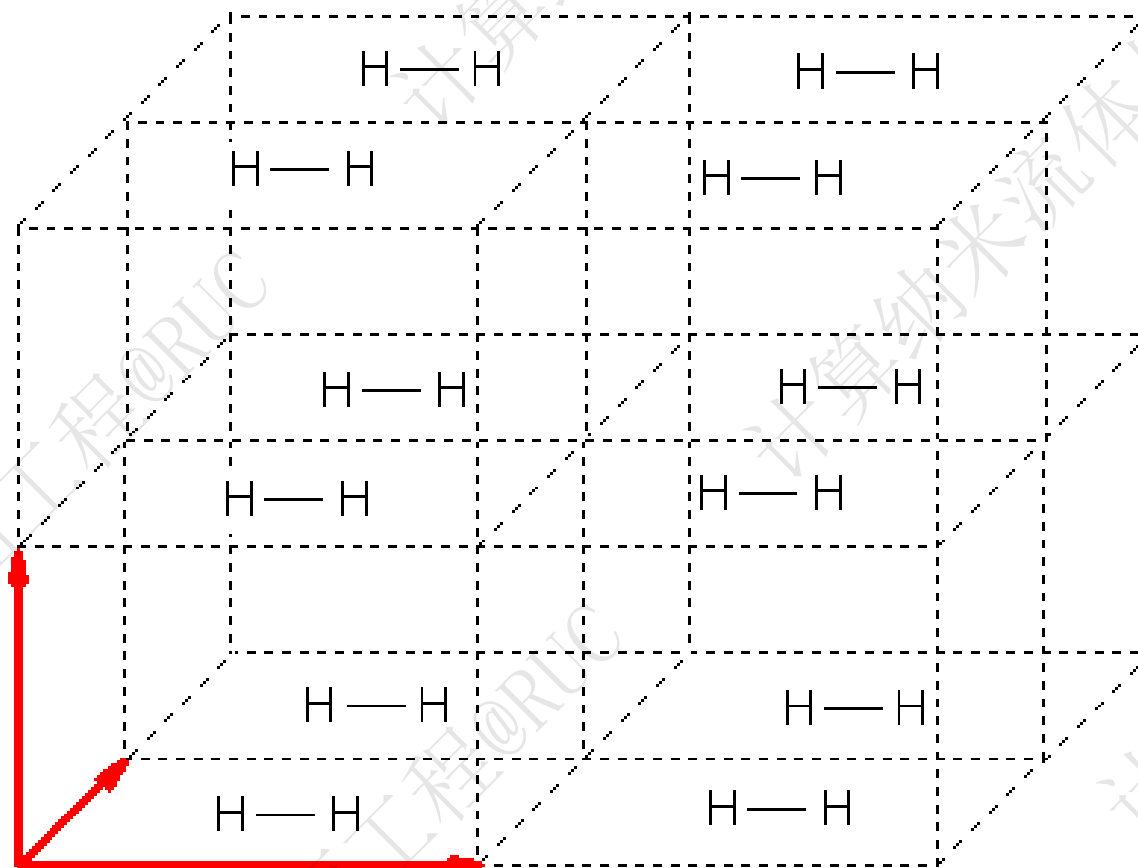
7) 材料光学性质计算



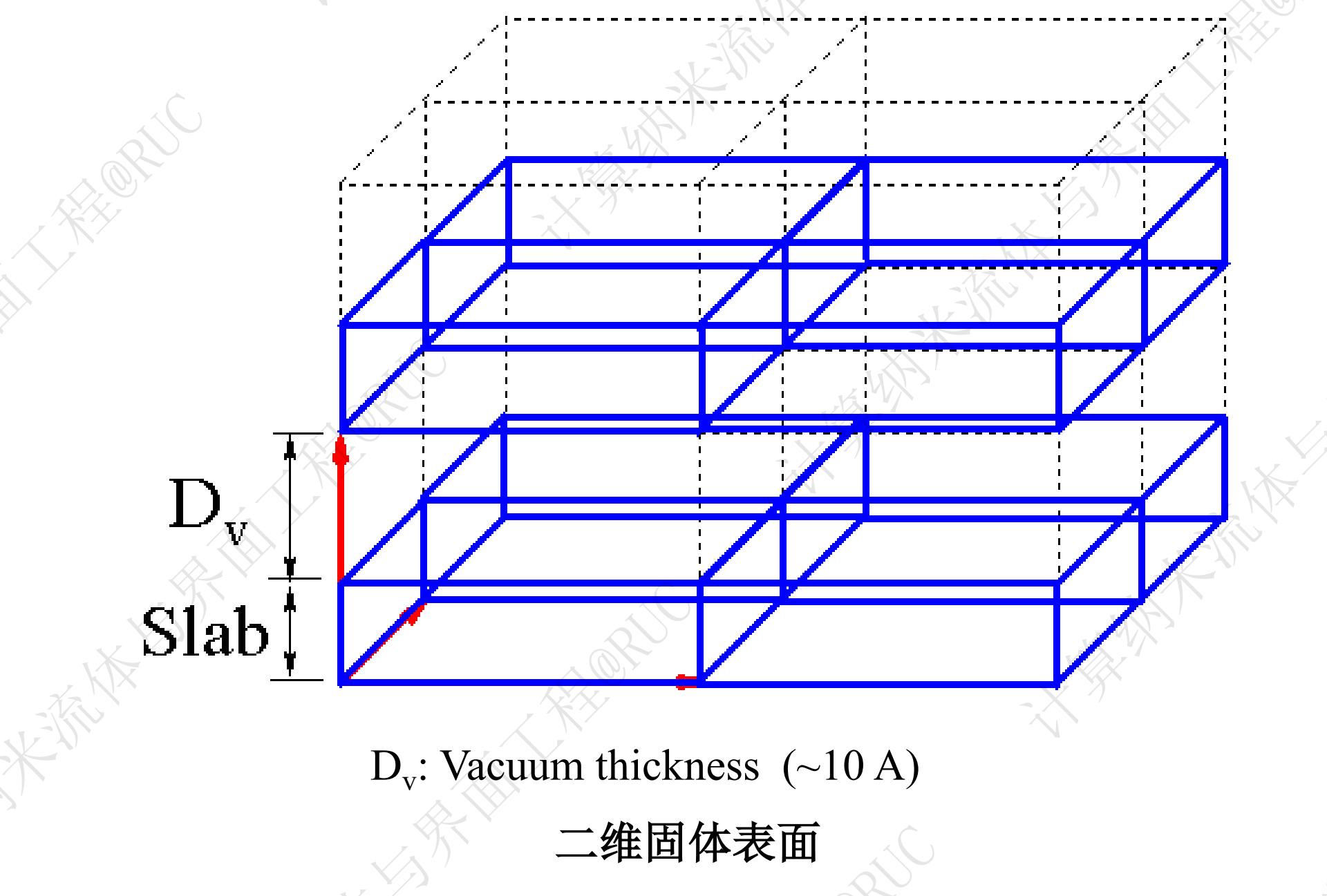
8) 其它性质计算，包括功函、力学性质等

2. 重复平板模型(或层晶模型):

VASP程序采用重复平板模型来模拟零维至三维体系



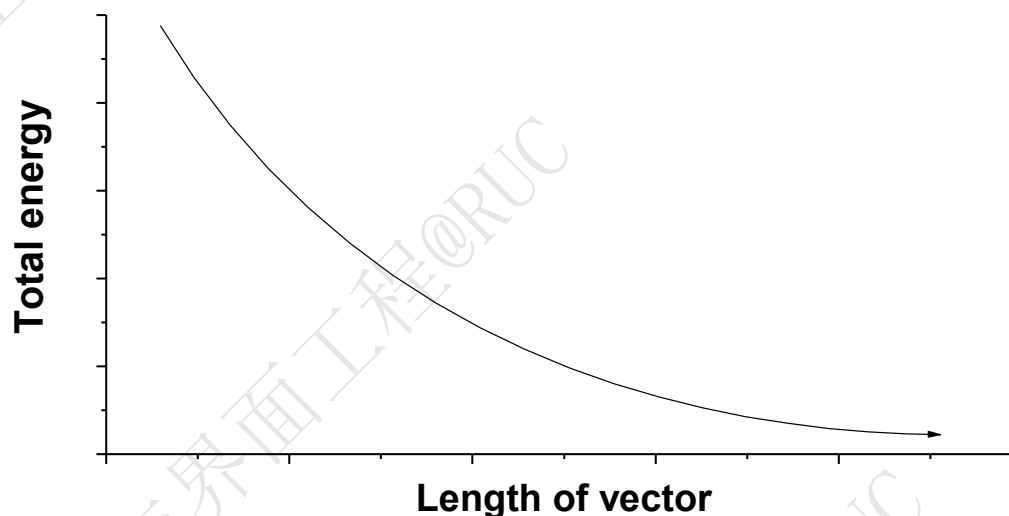
零维分子体系



说明：

重复平板模型中的平移矢量长度必须合理选择，以保证：

- 1) 对于分子体系，必须保证相邻重复单元中最近邻原子之间的距离必须至少7~10埃以上；
- 2) 对于一维体系，相邻两条链最近邻原子之间的距离必须至少7~10埃以上；
- 3) 对二维体系，上下两个平板最近邻原子之间的距离必须至少7~10埃以上；
- 4) 严格意义上，通过考察体系总能量/能量差值对真空区大小的收敛情况来确定合理的平移矢量长度。



3. K网格大小的选择：

对于一维至三维体系的计算，需涉及k点数目的选择，对于K点的确定，它与布里渊区的形状以及对称性有关。VASP的K点输入方法有多种，其中最常用的是直接给定**K-mesh**的大小，然后程序根据布里渊区的形状以及对称性自动生成各K点的坐标和权重。

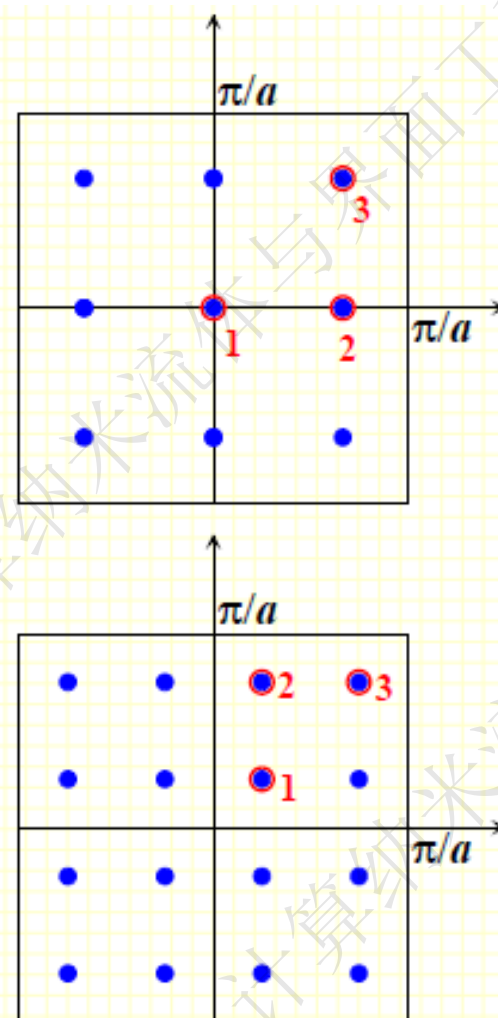
对于**K-mesh**的确定方法，通常通过考察总能量/能量差的**收敛**程度来确定，能量的**收敛**标准是1meV/atom。

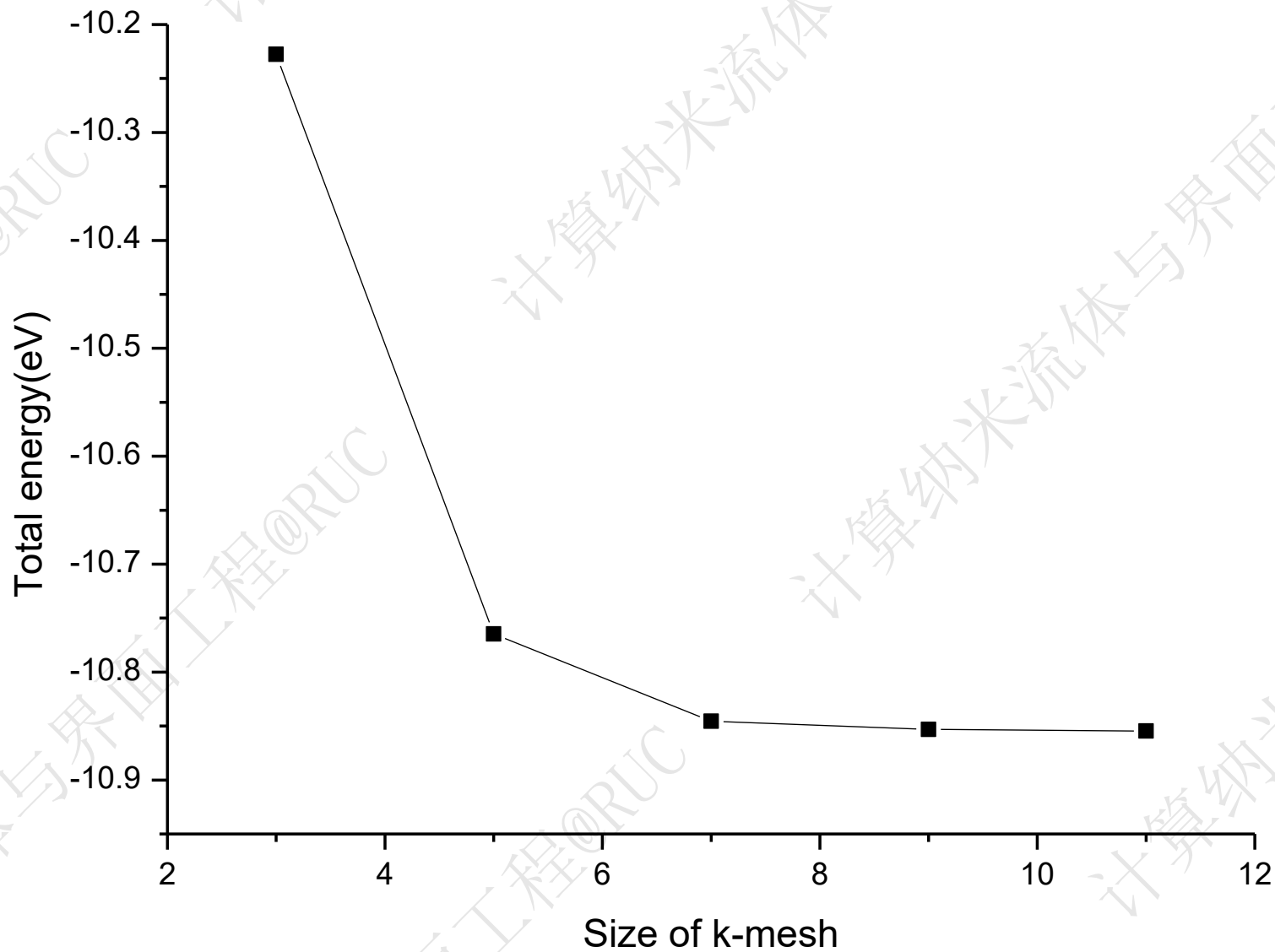
多数情况下，对半导体或绝缘体较小的K-mesh能量就可以收敛，对于导体，一般需要较大的K-mesh。

Examples

- $N_1=N_2=3$ total 9 k points
- including Γ point
- 3 irreducible points
- weighting factors
 $\alpha_1 = 1/9, \alpha_2 = 4/9, \alpha_3 = 4/9$

- $N_1=N_2=4$ total 16 k points
- excluding Γ point
- 3 irreducible points
- weighting factors
 $\alpha_1 = 1/4, \alpha_2 = 1/2, \alpha_3 = 1/4$





硅体相总能量随K-mesh大小的变化情况

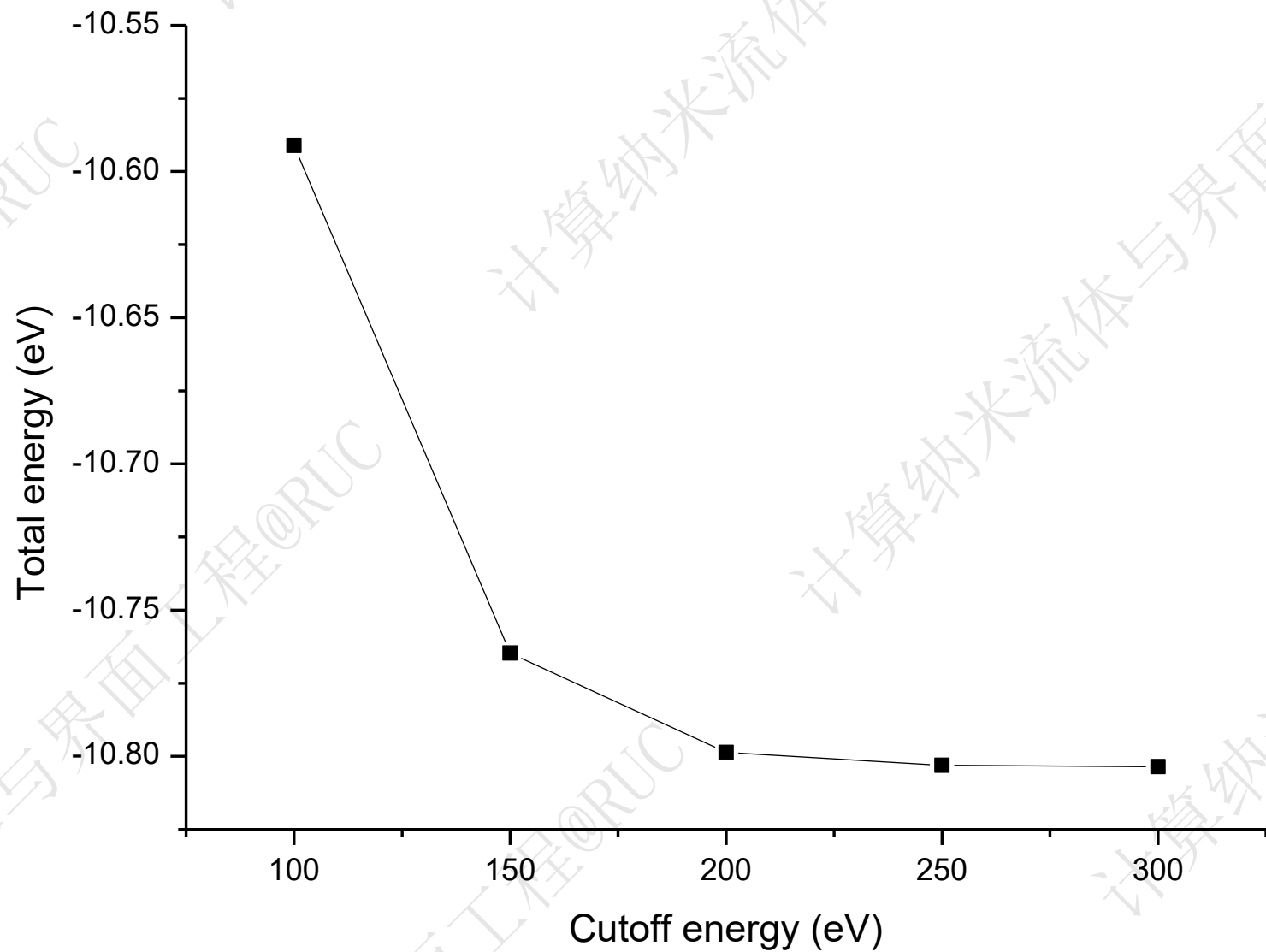
4. Cutoff energy大小的选择：

截至能的大小直接影响到计算结果的精度和计算速度，因此，它是平面波计算方法的一个重要参数。

理论上截至能越大计算结果也可靠，但截至能大小决定了计算中**平面波**的数目，平面波数目越多计算时间约长、内存开销越大。

一般根据所求物理量来确定截至能，例如计算体模量以及弹性系数时，需要较高的截至能，而通常的构型优化只要中等大小的截至能即可，另外动力学模拟时，可选取低的截至能。

不同元素在构造其赝势时，有各自的截至能，对于VASP，在缺省情况下，选取的是中等大小的截至能，这对于求解多数物理量是足够的。严格意义上，截至能的确定与K-mesh大小的确定类似，也是通过考察在总能量的收敛情况来确定(即保证总能量收敛至1meV/atom)。



硅体相总能量随cutoff energy大小的变化情况

5. VASP输入和输出文件：

输入文件(文件名必需大写)

INCAR：其内容为关键词，确定了计算参数以及目的；

POSCAR：构型描述文件，主要包括平移矢量、原子类型和数目、以及各原子坐标；

KPOINTS：K点定义文件，可手动定义和自动产生；

POTCAR：各原子的赝势定义文件。

主要输出文件

OUTCAR : 最主要的输出文件, 包含了所有重要信息;

OSZICAR : 输出计算过程的**能量迭代信息**;

CONTCAR: 内容为**最新一轮的构型**(分数坐标, **可用于续算**);

CHGCAR和**CHG** : 电荷密度;

WAVECAR : 波函数文件;

EIGENVAL: 记录各K点的**能量本征值**, 用于绘制能带图;

XDATCAR: 构型迭代过程中各轮的构型信息(分数坐标, 用于动力学模拟);

DOSCAR : 态密度信息。

POSCAR文件内容说明:

Silicon bulk (Title)

2.9 (Scaling factor or lattice constant)

0.0 1.0 1.0 (第一个平移矢量的方向)

1.0 0.0 1.0 (第二个平移矢量的方向)

1.0 1.0 0.0 (第三个平移矢量的方向)

2(单胞内原子数目以及原子种类)

Selective dynamics(表示对构型进行部分优化, 如果没这行, 则表示全优化)

Direct (表示所采用的为分数坐标, 如果内容为Car, 则坐标单位为埃)

0.125 0.125 0.125 T T T (各原子坐标以及哪个方向坐标放开优化)

-0.125 -0.125 -0.125 T T T

surface of mgo(100) (2*2)Mg

1.0000000000000000

| | | |
|--------------------|--------------------|---------------------|
| 5.9459999999999997 | 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 |
| 0.0000000000000000 | 5.9459999999999997 | 0.0000000000000000 |
| 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 | 20.0000000000000000 |

20 20 (体系中有2种元素，各自的原子数目分别为20， 20)

Selective dynamics

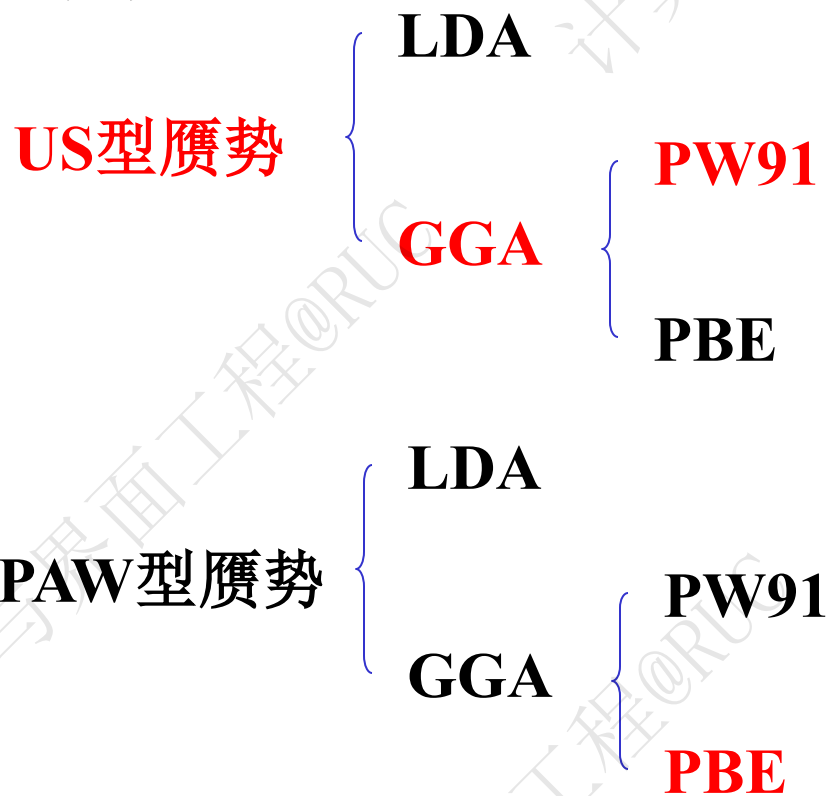
Direct

| | | | | | |
|--------------------|--------------------|--------------------|---|---|---|
| 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.5000000000000000 | 0.0000000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.5000000000000000 | 0.5000000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.0000000000000000 | 0.5000000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| | | | | | |
| 0.2500000000000000 | 0.2500000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.7500000000000000 | 0.2500000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.2500000000000000 | 0.7500000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| 0.7500000000000000 | 0.7500000000000000 | 0.0000000000000000 | F | F | F |
| | | | | | |

POTCAR文件内容说明:

VASP程序本身有提供了赝势库，只需将体系各类原子的赝势合并在一起即可，但需注意到:

1) 赝势类型:



US型赝势所需截至能较小，计算速度快，PAW赝势截至能通常较大，而且考虑的电子数多，计算慢，但精确度高。

2) POTCAT中各原子赝势定义的顺序必需与POSCAR中相同:

surface of mgo(100) (2*2)Mg

1.0000000000000000

5.9459999999999997 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000000 5.9459999999999997 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 20.0000000000000000

20 20

Selective dynamics

Direct

.....

3) 对各原子的赝势参数，我们最关心的是截至能以及电子数；

4) POTCAR的泛函类型必需与INCAR中GGA关键词定义的类型一致；

5) 使用zcat命令产生和合并POTCAR文件。


```
US Si
4.00000000000000000000 ———— 电子数目和组态
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =Si: s2p2
LEXCH   = 91
EATOM   =    115.8331 eV,      8.5135 Ry
TITEL    = US Si
LULTRA   =          T       use ultrasoft PP ?
IUNSCR   =          1       unscreen: 0-lin 1-nonlin 2
RPACOR   =     1.580        partial core radius
POMASS   =     28.085; ZVAL    =     4.000        mass an
RCORE    =     2.480        outmost cutoff radius
RWIGS    =     2.480; RWIGS   =     1.312        wigner-
ENMAX    =    150.615; ENMIN   =    112.961 eV
EAUG     =    241.919
```

对应于中等大小的截至能
(构型优化时采用)

对应于低的截至能
(动力学模拟时采用)

KPOINTS文件内容说明:

一般有两种定义K点的方法:

1) 通过定义K-mesh大小, 由程序自动产生各K点:

Automatic mesh (title)

0 (为0时, 表示自动产生K点)

M (表示采用Monkhorst-Pack方法生成K点坐标)

5 5 5(对应于5x5x5网格)

0 0 0(原点平移大小)

2)手动定义各K点的坐标(一般仅在计算能带结构时使用):

k-points for MgO(100) (title)

31 (K点数目)

Rec (字母R打头表示为倒易空间坐标, 否则为实空间的坐标)

0.0 0.0 0.0 1.0 (各K点的坐标以及权重)

0.05 0.0 0.0 1.0

0.1 0.0 0.0 1.0

0.15 0.0 0.0 1.0

0.2 0.0 0.0 1.0

0.25 0.0 0.0 1.0

0.3 0.0 0.0 1.0

0.35 0.0 0.0 1.0

0.4 0.0 0.0 1.0

0.45 0.0 0.0 1.0

0.5 0.0 0.0 1.0

.....

The k-vector types of space group $P4/m$ (83)

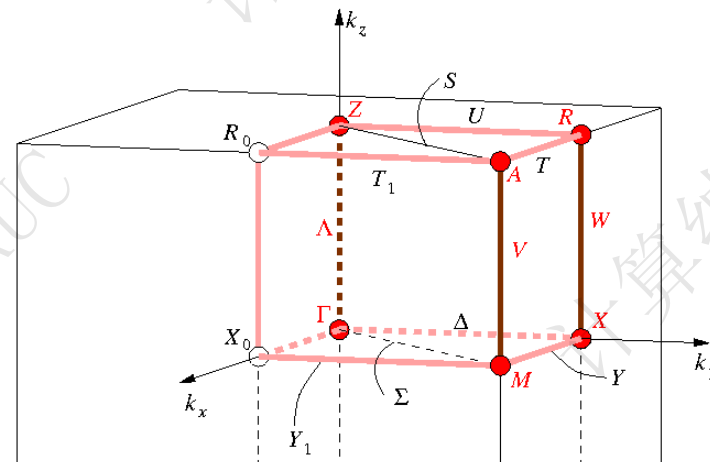
Brillouin zone

(Diagram for arithmetic crystal class $4/m\bar{P}$)

$P4/m-C_{4h}^1$ (83) to $P4_2/n-C_{4h}^4$ (86)

Reciprocal-space group ($P4/m$)*, No. 83

The table with the k vectors.



<http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-kv-list?gnum=77>

6. VASP安装和运行:

(1) VASP程序安装:

- a. 设置编译环境: 安装Fortran编译器, 常用为IFC
- b. 对于并行版本vasp的编译, 还需安装MPICH
- c. 编译vasp自带的库文件
- d. 对makefile进行修改, 包括BLAS和Lapack库文件所在目录, 一般可采用IFC所带的数学库
- e. 运行make命令进行编译

(2) 创建输入文件, 包括INCAR, KPOINTS, POSCAR和POTCAR

(3) 运行vasp:

单机版:

```
~/bin/vasp.4.5-ifc-mk-sp > vasp.out &
```

版本号

编译环境

多个K点

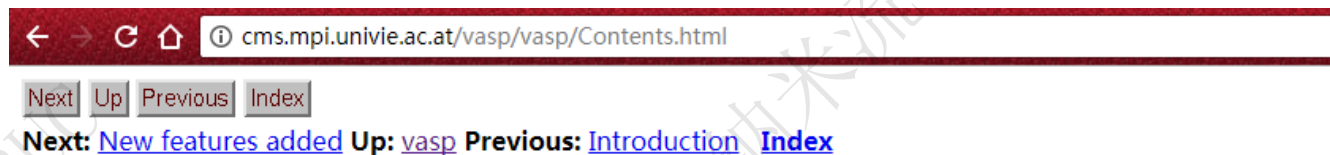
Single process

并行版本:

CPU数目

```
mpirun -np 4 -machinefile ./hosts ~/bin/vasp.4.5-ifc-mk-mp  
> & vasp.out &
```

存放要并行运算的机器名(IP)



Contents

- [New features added](#)
 - [VASP 4.6](#)
 - [VASP 5.2.2: Release note](#)
 - [VASP 5.2: Manual updates](#)
- [VASP an introduction](#)
 - [History of VASP](#)
 - [Outline of the structure of the program](#)
 - [Tutorial, first steps](#)
- [The installation of VASP](#)
 - [How to obtain the VASP package](#)
 - [Installation of VASP](#)
 - [Compiling and maintaining VASP](#)
 - [Updating VASP](#)
 - [Pre-compiler flags overview, parallel version and Gamma point only version](#)
 - [Compiling VASP.4.X, f90 compilers](#)
 - [Performance optimisation of VASP](#)
 - [Performance profile of some machines, buyers guide](#)
 - [Performance of serial code](#)
 - [Performance of parallel code on various machines](#)
- [Parallelization of VASP.4](#)
 - [Fortran 90 and VASP](#)
 - [Most important Structures and types in VASP.4.2](#)
 - [Parallelization of VASP.4.x](#)
 - [Files in parallel version and serial version](#)

<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Contents.html>

常用关键词使用说明

(部分参考清华大学物理系苏长荣编写的VASP安装和使用说明)

(1) SYSTEM=string

默认: unknown system

作业说明语句。

(2) ISTART=0|1|2

默认: 存在WAVECAR文件时, 1; 否则0。

ISTART

0 新作业, 由INIWAV决定初始波函数的产生方法。

1 Restart作业。波函数从WAVECAR文件读入, 并根据现在的元胞几何(POSCAR文件)和ENCUT(INCAR 文件)进行调整。如WAVECAR不存在或不合适时, ISTART将回到0。当在restart作业时, 元胞几何或ENCUT改变时推荐此设置。

2 Restart作业。波函数从WAVECAR文件读入, 并不作波函数的调整(即使元胞几何和ENCUT已经改变)。如WAVECAR不存在或不合适时, ISTART将回到0。在作离子驰豫时, 如果同时也做元胞几何的驰豫时, 在restart作业时可用此设置。在一般情况下不用。

(3) **LREAL**= *.FALSE. | .TRUE. | On | Auto*
默认: *.FALSE.*

LREAL决定投影操作在实空间进行还是在倒空间进行。

一般单胞尺寸大时，选实空间，小单胞选取倒易空间。

(4) **PREC**=*Low | Medium | High | Accurate*
默认: *Medium*

INCAR中未指定ENCUT时（即从POTCAR文件读入），PREC控制了ENCUT应取什么值。*PREC = Low*时，ENCUT取POTCAR中的最小值ENMIN，*PREC = Medium*或*Accurate*时，ENCUT取POTCAR中的最大值ENMAX，而*PREC = High*时，ENCUT将取ENMAX的1.3倍。

(5) **ENCUT**=数值
用户手动定义截至能，如果没有，则由**PREC**选项确定。

(6) **EDIFF**= $1e-4$
总能计算中的允许误差，默认值为 10^{-4} 。

EDIFFG=EDIFF×10

离子驰豫运动的结束条件，默认值为 $EDIFF \times 10$ 。

当数值为负数时，表示以力作为收敛标准，多数情况均采用力作为收敛标准。

(7) ALGO=38|48

该关键词确定能量计算迭代方法

38-采用Davidson优化方法；(可靠，但速度慢)

48-采用RMM-DIIS算法；(常用，速度快)

(8) ISYM=0|1|2

该关键词确定能量和构型优化时是否使用对称性(将影响到K点数目和计算量大小)

0-不使用对称性；

1-采用对称性；

2-用于PAW型赝势；

(9) NELM=整数

该关键词确定能量自洽场最大迭代轮数，缺省为60轮；

NELMIN=整数

在构型优化中，计算每个构象能量时最少迭代轮数，一般为3~4，以保证能量和力的稳定性；

(10) GGA=*PW*|*PB*|*LM*|91|*PE*|*RP*

PB Perdew-Becke

PW Perdew-Wang 86

LM Langreth-Mehl-Hu

91 Perdew-Wang 91

PE Perdew-Burke-Ernzerhof

RP revised Perdew-Burke-Ernzerhof

定义DFT泛函类型，注意要与POTCAR中的赝势类型一致。

(11)

ISIF=0|1|2|3|4|5|6

默认：IBRION=0时，0，其他2。

ISIF控制在离子运动中计算应力张量。如在作离子弛豫时的默认值2，将计算力，应力张量，离子可移动，但元胞的形状和大小都不改变。具体参考下表。

| ISIF | 计算力 | 应力张量 | 弛豫离子 | 改变元胞形状 | 改变元胞体积 |
|------|-----|-------------------------|------|--------|--------|
| 0 | 是 | 否 | 是 | 否 | 否 |
| 1 | 是 | trace only ^a | 是 | 否 | 否 |
| 2 | 是 | 是 | 是 | 否 | 否 |
| 3 | 是 | 是 | 是 | 是 | 是 |
| 4 | 是 | 是 | 是 | 是 | 否 |
| 5 | 是 | 是 | 否 | 是 | 否 |
| 6 | 是 | 是 | 否 | 是 | 是 |
| 7 | 是 | 是 | 否 | 否 | 是 |

(12) ISPIN=1|2

1-非自旋极化计算(缺省)

2-自旋极化计算, 将给出体系磁矩大小(对含有过渡金属原子体系，一般均要采用自旋极化方法)。

(13) $ISMEAR = -5|-4|-3|-2|-1|0|N$

SIGMA: 展开的宽度 (单位: eV)

默认: $ISMEAR = 1$ $SIGMA = 0.2$

ISMEAR决定如何确定电子的部分占据数。

- 5 采用Blöchl校正的四面体方法。计算大块总能时推荐使用。
- 4 不采用Blöchl校正的四面体方法
- 3 对不同的ISMEAR进行循环, 在INCAR文件中额外加一行
 $SMEARINGS = ismear1\ sigma1\ ismear2\ sigma2 \dots$
- 2 电子占据数从INCAR文件中读入, 并在计算中保持不变。在INCAR文件中加额外一行如:
 $FERWE = f1\ f2\ f3 \dots$
如进行电子自旋极化计算, 则加入如下一行:
 $FERDO = f1\ f2\ f3 \dots$
上述占据数按每个k点每个能带排列。上述两种情况占据数都在0和1之间。
- 1 费米展开
- 0 高斯展开

ISMEAR选择:

- 1) 对半导体或绝缘体选取-5，如果单胞较大时，或者所选取k点数目少时，用0；
- 2) 对导体，通常用0；

SIGMA取值:

SIGMA取值的原则是使得计算得到的TS项(OUTCAR中)，分摊到每个原子上时小于1meV，否则得到的总能量不准确，对导体尤其要注意该参数的选择。

(14) 以下为构型优化所用关键词:

•**NSW=整数**

构型优化的最大轮数

•**IBRION = -1|0|1|2**

构型优化方法:

-1-构型不变更;

0-分子动力学模拟;

1-采用准牛顿方法确定新的构型(当初始构型较合理时使用);

2-采用CG方法确定构型(当初始构型离平衡位置较远时使用)。

•**POTIM=数值**

控制构型优化步长, 缺省为0.5, 对动力学模拟则为时间步长(单位为fs)

(15) 输出控制关键词:

LCHARG = .FALSE. (输出电荷密度?)

LWAVE = .FALSE. (输出波函数?)

LVTOT = .FALSE. (输出静电势, 求功函时使用)

(16) 其他关键词:

NPAR = 8 (CPU数目, 并行计算时使用)

LPLANE = .TRUE. (与并行算法有关)

实例:

SYSTEM = Silicon bulk

NPAR = 8

LPLANE = .TRUE.

Electronic minimisation

ISTART = 0

LREAL= .TRUE.

PREC = Medium precision: Medium/High/Low

EDIFF = 1e-4 converge criterion: default = 1e-4

EDIFFG = -0.02 converge criterion for relation loop

IALGO = 48 algorithm (8-CG, 48-RMM)

NELMIN = 3 the minimum number of electronic SC steps

ISYM = 0 symmetry (2-PAW on, 1-US-PP's on, 0-off)

GGA = 91 Perdew-Wang 91

ISIF = 3 Relax ions

ISPIN = 1

ISMEAR = 0 (tetrahedron/gaussian/m-p)

SIGMA = 0.1

OUTPUT CONTROL

LCHARG = .FALSE.

LWAVE = .FALSE. the i/o cost is not worth it.

LVTOT = .TRUE.

IONIC RELAXATION

NBLOCK = 1 steps for inner block

NSW = 300 number of steps for IOM

IBRION = 1 -1:no update 0-MD 1-quasi-New 2-CG

POTIM = 0.50 default 0.5 of IBRION=1-3

练习：

对金红石型 TiO_2 的构型(包括原子位置和单胞外形)进行优化，并考察k网格和动能大小对计算结果的影响。

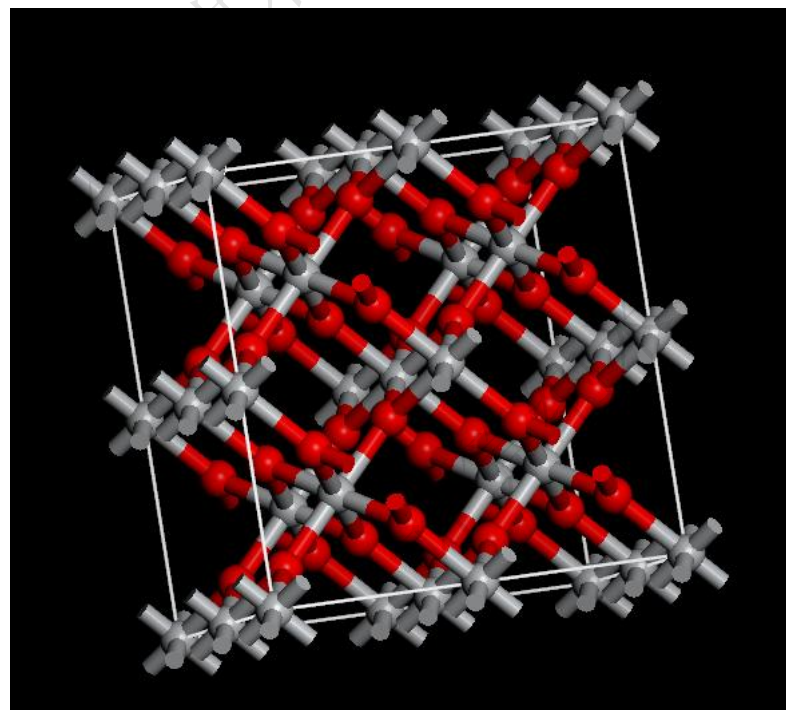
金红石型 TiO_2 构型的实验测量结果为：

空间群—No. 136 $P4_2/mnm$

单胞参数— $a=b=4.582\text{\AA}$, $c=2.953\text{\AA}$

原子位置—Ti: (0, 0, 0)

O: (0.30473, 0.30473, 0)



步骤:

1. 确定构型，包括平移矢量以及各个原子的坐标。

构型参数可从Materials Studio获取，通过作图可得到平移矢量和各原子的坐标，也可用其它软件(如crystal)获得。

2. 构造VASP四个输入文件，包括INCAR、KPOINTS、POSCAR和POTCAR

3. 运行vasp程序

计算结果处理

一般情况下，计算结果的处理均是在构型优化的基础上进一步进行的，常见的结果处理包括：

(1) 能带结构绘制步骤

(a) 首先在INCAR文件中定义能带的数目，一般空带数目至少为占据带数目的一半，同时需要保存波函数和电荷密度文件：

NBANDS=120 -----能带数目 $NELECT/2 + NIONS/2$

LWAVE=.TRUE. -----保存波函数

LCHARG=.TRUE. -----保存电荷密度

NSW = 1 -----构型优化步数为1

IBRION = -1 -----构型保持不变

最后两行内容相当于计算单点能。

(b) 将构型优化后产生的CONTCAR文件拷贝为POSCAR文件;

(c) 运行vasp;

(d) 建立新的计算目录, 将INCAR, POSCAR, POTCAR, WAVECAR, CHG, CHGCAR文件移至该目录下, 对INCAR文件作如下修改:

ISTART = 3 -----从WAVECAR读入波函数

ICHARG = 11 -----从CHG读入电荷密度

NBANDS=120 -----能带数目必须和前面相同

(e) 建立新的KPOINTS文件, 手动定义k点, 例如:

k-points of Si(100)

51

Rec

0.0 0.0 0.0 1.0

0.05 0.0 0.0 1.0

0.1 0.0 0.0 1.0

0.15 0.0 0.0 1.0

0.2 0.0 0.0 1.0

0.25 0.0 0.0 1.0

.....

-----Title

----- K点数目

-----各k点坐标采用倒易空间坐标($2\pi/a$)

-----k点坐标和权重

(f) 运行vasp

(g) 运行vaspband程序，得到相应的dat文件，用origin等软件绘图：

Draw the band structure of VASP

Two files, EIGENVAL and OUTCAR are needed

Spin-polarized calculation(T/F)? (是否自旋极化计算)

f

Number of lines along the BZ: (布里渊区特殊线数目)

5

K point sequence used to separate lines: (各线段始终点序号)

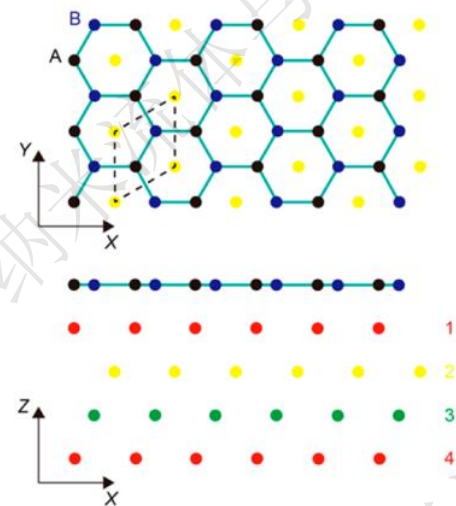
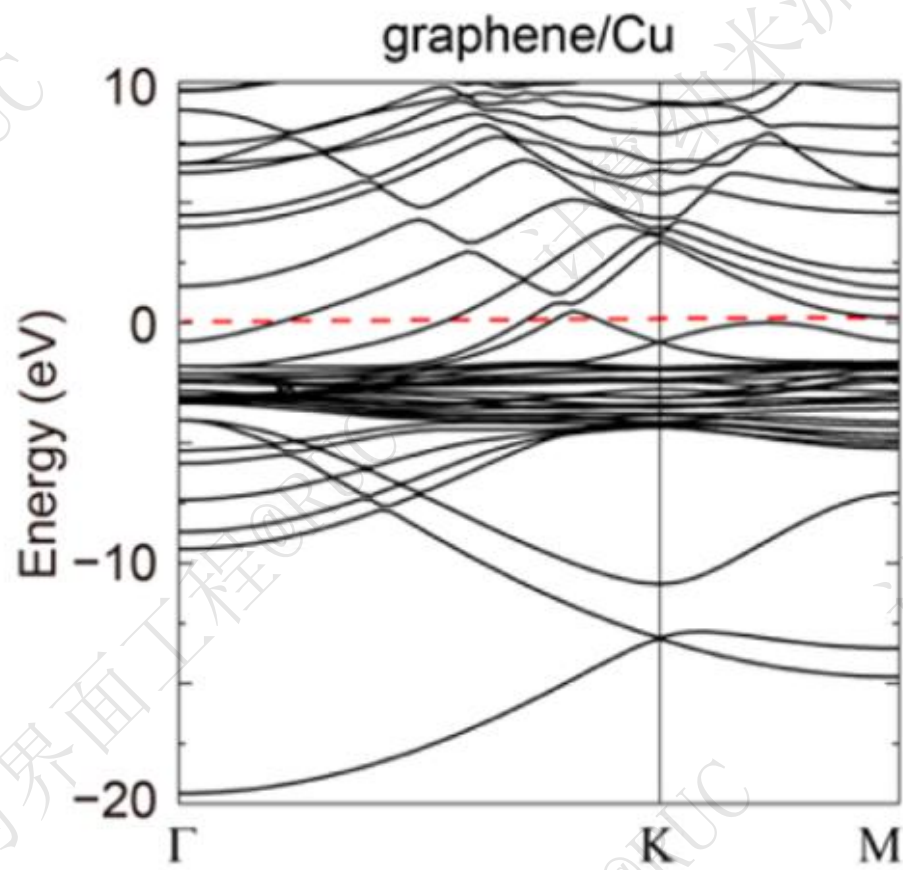
1 11 21 31 41 51

Set the Fermi level to zero(T/F)? (是否费米设置为零点)

t

Results are stored in DAT file.

Fermi level: -0.3825 eV



(2) 态密度图绘制步骤

(a) 首先在INCAR文件需定义能带的数目，以及DOS的点数，同时在计算时可以利用前面能带计算时所得到的WAVECAR和CHG文件：

| | |
|---------------------|-----------------------|
| ISTART = 3 | -----从WAVECAR读入波函数 |
| ICHARG = 11 | -----从CHG读入电荷密度 |
| NBANDS = 120 | -----能带数目必须和前面相同 |
| NSW = 1 | -----构型优化步数为1 |
| IBRION = -1 | -----构型保持不变 |
| NEDOS = 501 | -----DOS的点数(与图形分辨率有关) |

(b) 运行vasp程序

(c) 编辑DOS输入文件，运行vaspdos程序得到相应的fort.25文件

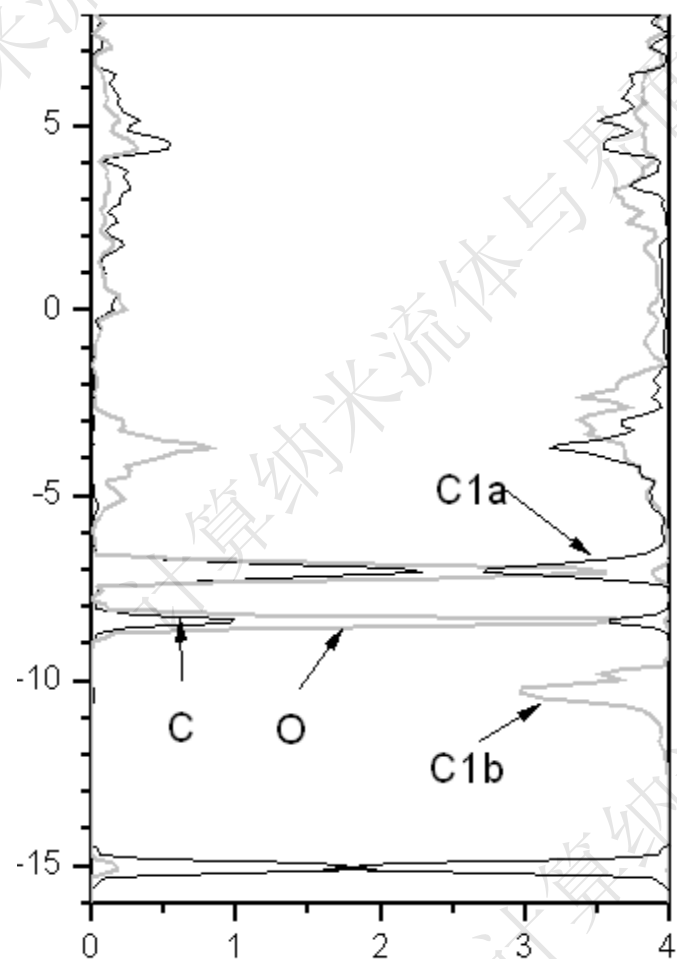
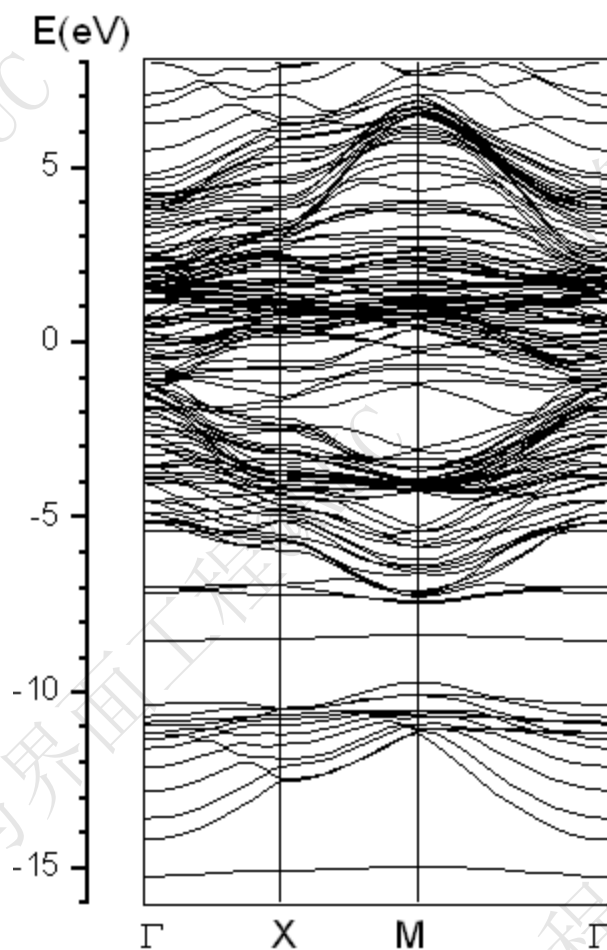
DOS输入文件内容:

F -----是否自旋极化计算
9 -----轨道数(9组还是3组) 版式本确定, 4.5-3, 4.6-9
3 -----要计算的DOS数目
-2 -----为负整数时, 表示所考察的为原子的DOS
29 30 -----为原子编号
3 -----为正整数时, 表示所考察的为原子轨道的DOS
2 3 4 -----为原子轨道的编号
5
5 6 7 8 9

注: 对于轨道数为3组时, 依次分别为s, p, d;

当轨道数为9时, 依次为s, py, pz, px, dxy, dyz, dz², dxz, dx²-y²

(d) 运行cdos98程序得到DOS的dat文件, 绘制DOS图



VC(001)缺陷表面吸附CO能带图和分DOS图

(3) 电荷密度图绘制步骤

(a) 二维(差)电荷密度图(等高线图):

运行vaspchg程序，从CHG或CHGCAR文件读入数据，定义所要绘图的区域:

```
-----  
|Read the data from CHGCAR file of VASP, then output the charge|  
|densities of certain plane defined by user. Also can calculate|  
|the difference charge density map between two CHGCAR files.  |  
|      Last modified in 18/10/2006 by Yongfan Zhang      |  
|      Fuzhou University                                |  
|-----
```

Spin polarization calculation(T/F): (是否为自旋极化计算)

f
How many type of atom in the system: (体系所包含原子种类)

3
Enter output filename: (输出文件名)

chg.dat

In gnuplot format:(T/F) (是否保存为gnuplot格式)

f

Lengths of first two vectors: 7.7154 7.7154

Angle between them(degree): 90.0000

Number of atom: 30

Coordinates of each atom:

| | | | |
|---|----------|----------|----------|
| 1 | 0.629638 | 3.847029 | 6.351390 |
| 2 | 0.601369 | 7.713053 | 6.259482 |
| 3 | 3.147404 | 3.841682 | 6.499098 |
| 4 | 2.864280 | 7.677446 | 5.644728 |
| 5 | 0.082416 | 1.947467 | 4.999068 |

.....

Lengths of three directons are: 7.7154 7.7154 18.0000

Grids in three directions: 54 54 126

Steps in three directions: 0.1429 0.1429 0.1429

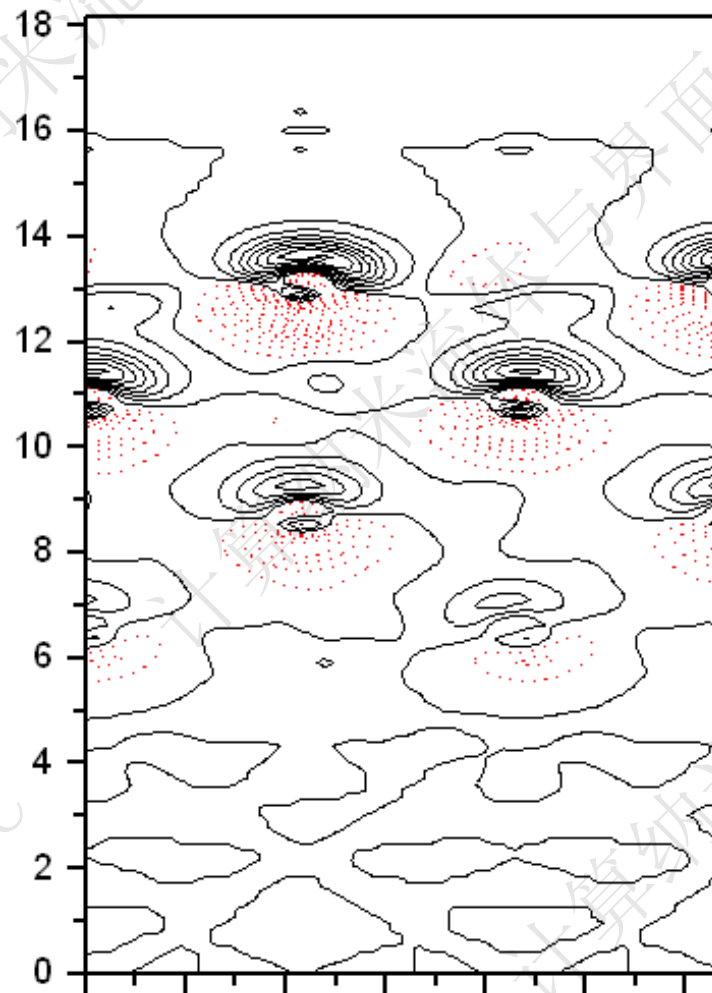
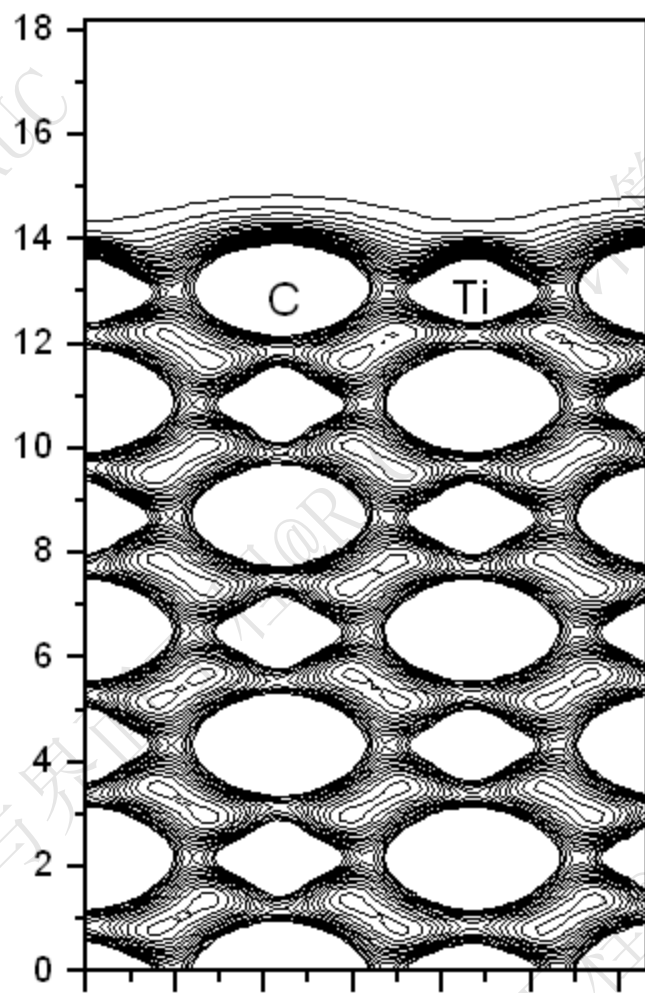
Volume in A^3: 1071.49259

Select a method to define the plane(enter 1 or 2):

1- Defined by the coordinates of three corners

2- Defined by the positions of three atoms

(定义所要绘制的区域)
(通过定义三个角的坐标)
(通过定义三个原子)



TiC(001)表面的总电荷密度图(左)和差电荷密度图(右)

(b) 三维电荷密度图:

运行vaspcube程序, 从CHG或CHGCAR文件读入数据, 然后再使用gopenmol绘制图像。

Transfer the charge density file of VASP to the format of Gaussian cube file.

Note:

Only test for the cubic, tetragonal and orthorhombic systems!
Namely, the third vector of cell must be orthogonal to the other two vectors, and the first vector is along X direction.

.....

Last modified in 23/10/2006 by Yongfan Zhang

Input and output filenames:

(输入和输出文件名)

CHG 1.cub

Number of atomic type:

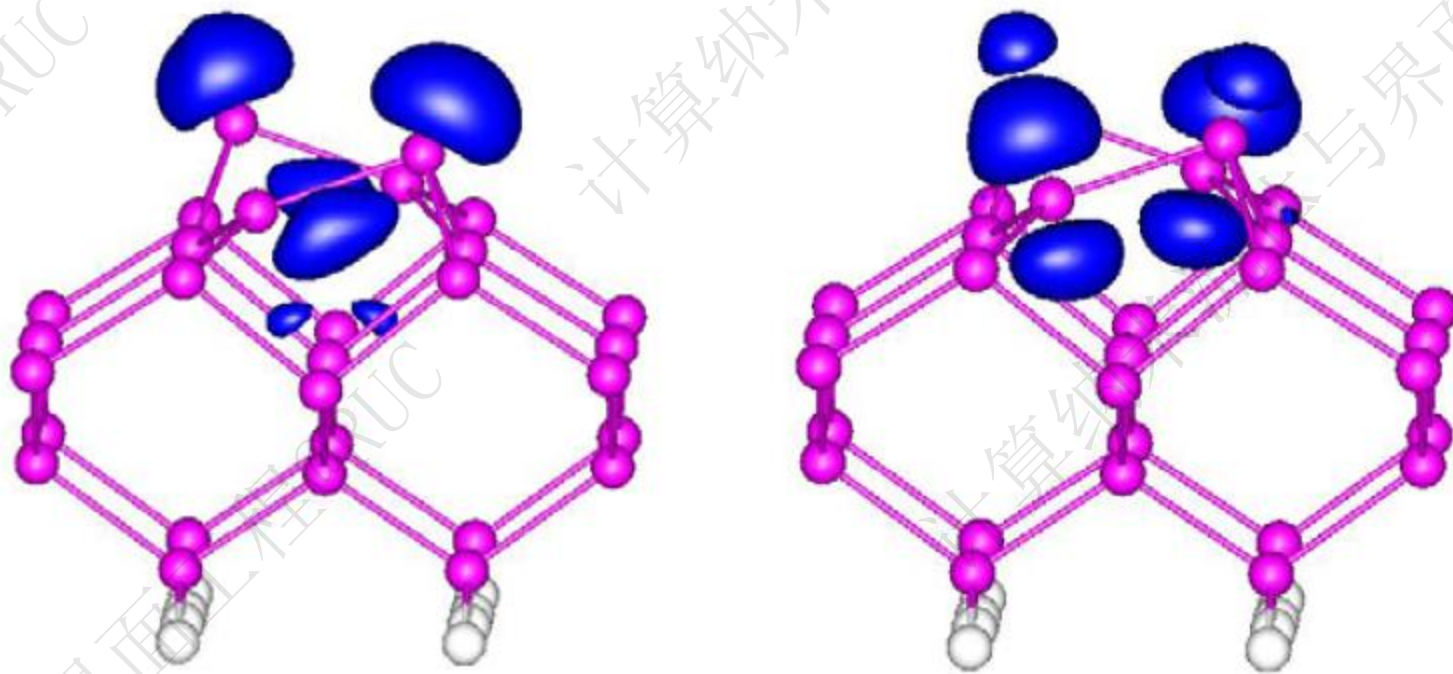
(体系原子种类数目)

3

Repeat number along three directions:

(沿三个方向的扩展数目)

1 1 1



Si(001)表面的 π (左)和 π^* (右)表面态电荷密度图

(4) 原子电荷分析

VASP程序可采用Bader提出的方法来获得原子电荷，具体过程：

- (a) 运行考虑内核电荷密度版本的VASP程序；
- (b) 运行bader CHGCAR命令，得到ACF.dat文件，该文件给出体系各原子所得的电子数：

| # | X | Y | Z | CHARGE | MIN DIST |
|---|--------|--------|--------|--------|----------|
| 1 | 0.6296 | 3.8470 | 6.3514 | 4.6215 | 0.8578 |
| 2 | 0.6014 | 7.7131 | 6.2595 | 3.4403 | 0.0016 |
| 3 | 3.1474 | 3.8417 | 6.4991 | 4.1537 | 0.7766 |

.....

- (c) 重复上述两个步骤，计算自由原子所带电子数目；
- (d) 比较(b)和(c)的结果可得各原子电荷大小。

(5) STM图像模拟

采用基于Tersoff-Hamann方法模拟STM图像，相应的INCAR文件：

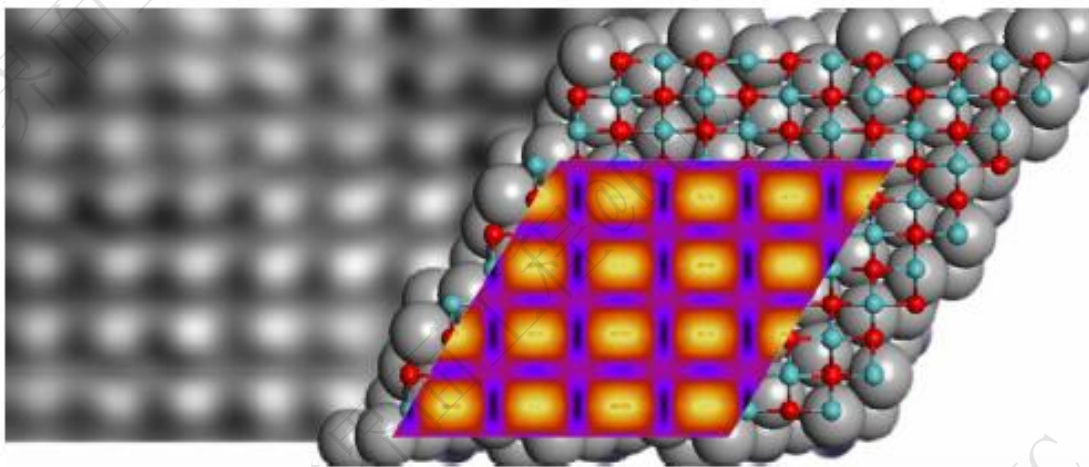
ISTART = 3 -----需存在相应的WAVECAR文件

LPARD=.TRUE.

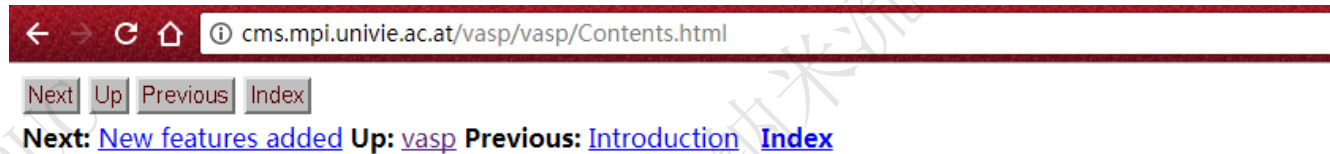
NBMOD=-3

EINT= -1.0 0.00 -----模拟的电压范围

最后采用PARCHG文件绘制STM图像



官网查询



Contents

- [New features added](#)
 - [VASP 4.6](#)
 - [VASP 5.2.2: Release note](#)
 - [VASP 5.2: Manual updates](#)
- [VASP an introduction](#)
 - [History of VASP](#)
 - [Outline of the structure of the program](#)
 - [Tutorial, first steps](#)
- [The installation of VASP](#)
 - [How to obtain the VASP package](#)
 - [Installation of VASP](#)
 - [Compiling and maintaining VASP](#)
 - [Updating VASP](#)
 - [Pre-compiler flags overview, parallel version and Gamma point only version](#)
 - [Compiling VASP.4.X, f90 compilers](#)
 - [Performance optimisation of VASP](#)
 - [Performance profile of some machines, buyers guide](#)
 - [Performance of serial code](#)
 - [Performance of parallel code on various machines](#)
- [Parallelization of VASP.4](#)
 - [Fortran 90 and VASP](#)
 - [Most important Structures and types in VASP.4.2](#)
 - [Parallelization of VASP.4.x](#)
 - [Files in parallel version and serial version](#)

<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Contents.html>

谢谢！

王艳磊

Email: ylwang17@ruc.edu.cn